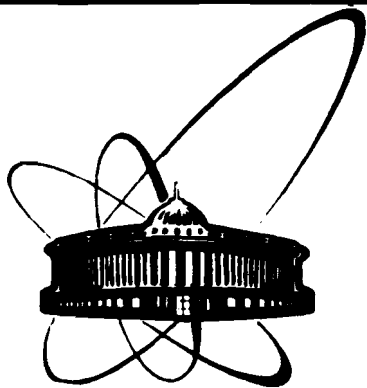


89-667



ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА

P17-89-667

Н.М.Плакида, А.Ю.Черный\*

ИЗОТОПИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ  
В МОДЕЛИ СВЕРХПРОВОДНИКА  
СО СТРУКТУРНЫМ ФАЗОВЫМ ПЕРЕХОДОМ

Направлено в журнал "Теоретическая  
и математическая физика"

---

\* Московский государственный университет  
им. М.В.Ломоносова

1989

## 1. Введение

Исследованию изотопического эффекта в высокотемпературных сверхпроводниках (ВТСП) уделяется большое внимание (см. [1]). В одноатомных металлических сверхпроводниках с атомной массой  $M$  температура сверхпроводящего перехода  $T_c$  пропорциональна  $M^{-\alpha}$ , где  $\alpha$  для переходных металлов оказывается близко к  $\frac{1}{2}$ . Для многоатомных сверхпроводников вводятся соответствующие парциальные параметры  $\alpha_i$   $i$ -го элемента с массой  $M_i$ , определяемые аналогично:

$$\alpha_i = - \frac{\partial \ln T_c}{\partial \ln M_i}.$$

Для ВТСП значение  $\alpha$  для атомов кислорода оказывается, как правило, подавленным:  $\alpha \approx 0.2$  для  $\text{La}_{2-x}(\text{Ba}, \text{Sr})_x\text{CuO}_4$  с  $T_c \approx 40$  К и  $\alpha \approx 0.05$  для  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  с  $T_c \approx 90$  К [1-4]. Эти результаты поставили под сомнение традиционный электрон-фононный механизм сверхпроводимости, хотя в ряде работ были предложены различные механизмы подавления изотопического эффекта (см. [18]).

В то же время структурные исследования обнаруживают структурную неустойчивость ВТСП-соединений, наличие мягких мод, проявляющихся в аномально больших и анизотропных тепловых факторах ионов кислорода [5]. При этом в ВТСП  $\text{La}_{2-x}(\text{Ba}, \text{Sr})_x\text{CuO}_4$  [6] максимальная температура  $T_c$ , зависящая от концентрации примесных атомов, достигается вблизи структурного фазового перехода (СФП) при концентрации примеси  $x \approx 0.2$ . Это позволяет предположить, что ангармонизм взаимодействия атомов, приводящий к структурному переходу, играет немаловажную роль в ВТСП [7, 8].

В настоящей работе на примере точно решаемой модели структурного фазового перехода в решетке показано, что наличие мягких

оптических фононных мод может приводить (в рамках электрон-фононного механизма) к существенному изменению изотопического эффекта. Возникает зависимость  $\alpha$  от концентрации примеси  $x$  в  $\text{La}_{2-x}(\text{Ba}, \text{Sr})_x\text{CuO}_4$ , при этом значение  $\alpha$  меняется тем сильнее, чем ближе температуры сверхпроводящего и структурного переходов. Точная решаемость рассматриваемой модели существенно упрощает исследование в окрестности критической температуры СФП.

В разделе 2 рассматривается электронная подсистема и вычисляется температура  $T_c$  сверхпроводящего перехода в рамках теории Элиашберга. Раздел 3 посвящен исследованию свойств решетки при структурном переходе и вычислению постоянной  $\lambda$  электрон-фононного взаимодействия. В четвертом разделе вычисляется изотопический эффект для исходной модели, приводятся численные оценки для  $\text{La}_{2-x}(\text{Ba}, \text{Sr})_x\text{CuO}_4$ .

## 2. Гамильтониан модели. Температура сверхпроводящего перехода

Рассмотрим электрон-фононную систему, описываемую гамильтонианом:

$$H = \sum_{p\sigma} \epsilon_p a_{p\sigma}^* a_{p\sigma} + \sum_{q\sigma} v(q) a_{p\sigma}^* a_{p-q\sigma} Q_q + H_1.$$

Здесь  $\epsilon_p$  - электронный спектр,  $v(q) = \frac{iqV(q)}{\sqrt{M}}$ , где  $V(q)$  - матричный элемент экранированного электрон-фононного взаимодействия,  $M$  - масса иона,  $Q_q$  - нормальная фононная переменная,  $H_1$  - энергия колебаний решетки, которая будет рассмотрена в следующем разделе.

При описании электронной части гамильтониана мы не рассматриваем кулоновского взаимодействия между электронами, полагая, что оно может быть учтено стандартными методами [9] с помощью перенормировки постоянной электрон-фононного взаимодействия  $\lambda$  на величину  $\mu^*$ .

Следуя работе [10], можно получить самосогласованное уравнение для электронных температурных функций Грина. Эти уравнения не зависят от конкретного вида решеточной части гамильтониана системы  $H_1$  и получаются в приближении Мигдала при пренебрежении

перенормировкой вершины массового оператора, описывающего взаимодействие электронов с фононами во втором порядке по константе электрон-фононного взаимодействия. Массовый оператор выражается через полную электронную функцию Грина, что позволяет получить уравнения Элиашберга для рассматриваемой системы (см. [11]). Для постоянной электрон-фононного взаимодействия  $\lambda$ , определяющей температуру сверхпроводящего перехода в системе, получаем обычное выражение:

$$\lambda = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{\alpha^2 F(\omega)}{\omega}.$$

Где

$$\alpha^2 F(\omega) = \frac{1}{N(0)} \int_{s_f} \frac{d^2 p}{v_p} \int_{s_f} \frac{d^2 p'}{v_{p'}} \left[ -\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle\langle Q_q | Q_{-q} \rangle\rangle_{\omega+i\epsilon} \right] |v(p-p')|^2.$$

здесь  $N(0)$  - плотность электронов на поверхности Ферми  $s_f$ ,  $v_p = |\nabla_p \epsilon_p|$  - скорость электронов на поверхности Ферми  $s_f$ , введена функция  $\langle\langle Q_q | Q_{-q} \rangle\rangle_{\omega+i\epsilon}$ , являющаяся фурье-образом временной запаздывающей функции Грина [12].

Воспользовавшись дисперсионными соотношениями для функций Грина [12], после интегрирования по частоте в /1/ получаем

$$\lambda = \frac{1}{N(0)} \int_{s_f} \frac{d^2 p}{v_p} \int_{s_f} \frac{d^2 p'}{v_{p'}} \frac{|V(q)q|^2}{M} \chi_q(0),$$

где  $q = p - p'$ ,  $\chi_q(0) = \langle\langle Q_q | Q_{-q} \rangle\rangle_{0+i\epsilon}$  - статическая восприимчивость решетки.

Для оценки константы /2/ можно использовать приближение Мак-Миллана, согласно которому

$$\lambda = \frac{N(0)J^2}{M} \frac{1}{N} \sum_q \chi_q(0),$$

где  $J^2$  - усредненный по поверхности Ферми квадрат абсолютного значения матричного элемента электрон-фононного взаимодействия  $|V(q)q|$ .

Для модели гармонических фононов со спектром  $\omega_q$  обычно полагают

$$\frac{1}{MN} \sum_q \chi_q(0) = \frac{1}{MN} \sum_q \frac{1}{\omega_q^2} = \frac{1}{M \langle \omega^2 \rangle} = \frac{1}{\langle F \rangle},$$

где  $\langle F \rangle$  - средняя гармоническая силовая постоянная в решетке, и, таким образом,  $\lambda$  не зависит от массы ионов решетки.

Для оценки температуры сверхпроводящего перехода  $T_c$  можно воспользоваться одной из стандартных формул:

$$/4/ \quad T_c = \bar{\omega} f(\lambda, \mu^*),$$

где в случае слабой связи  $\lambda \leq 1$  согласно формуле Мак-миллана [19]

$$/5/ \quad f(\lambda, \mu^*) = \exp\left(-\frac{1.04(1+\lambda)}{\lambda - \mu^*(1+0.62\lambda)}\right),$$

или в случае промежуточной связи  $1 \leq \lambda < 10$  [15]

$$/6/ \quad f(\lambda) = 0.05(\lambda - 0.25),$$

где  $\mu^* \ll \lambda$  опущено.

здесь  $\bar{\omega}$  - средняя частота фононного спектра.

Как следует из /3/ и /6/, в случае гармонической решетки с  $\lambda$ , не зависящей от  $M$ , изотопический эффект в основном определяется зависимостью  $T_c \sim \bar{\omega}^{-1/2}$ , которая может изменяться лишь за счет дополнительной зависимости  $T_c$  от  $\mu^*$  в случае слабой связи /5/.

Целью нашей работы является исследование зависимости  $\lambda$  от  $M$  при наличии СФП в решетке. Для этого необходимо получить конкретный вид  $\chi_q(0)$ .

### 3. Структурный фазовый переход в решетке

Рассмотрим модель СФП, описываемую гамильтонианом (см. [16]):

$$H_1 = \sum_1 \left( \frac{1}{2M} P_1^2 - \frac{A}{2} Q_1^2 \right) + \frac{1}{4} \sum_{11'} F(1-1') (Q_1 - Q_{1'})^2 + \frac{B}{4N} \left( \sum_1 Q_1^2 \right)^2.$$

Здесь  $Q_1$  и  $P_1$  - соответственно нормальные локальные координата и импульс для мягкой фононной моды колебаний в 1-й примитивной ячейке,  $A > 0$  - параметр, определяющий частоту неустойчивой в гармоническом приближении моды колебаний  $\nu_0^2 = \frac{A}{M}$ ,  $B$  - постоянная, определяющая интенсивность ангармонического взаимодействия,

$M$ -эффективная масса, пропорциональная массе атома,  $F(1-1')$ -атомная силовая матрица второго порядка.

Для дальнейшего исследования удобно перейти к фононным

переменным  $Q_1 = \frac{1}{\sqrt{MN}} \sum_q e^{iq_1} Q_q$ :

$$/7/ \quad H_1 = \frac{1}{2} \sum_q (P_q^2 + \omega_q^2 Q_q Q_{-q}) + \frac{B}{M^2} \frac{1}{N} \left( \sum_q Q_q Q_{-q} \right)^2.$$

Здесь

$$\omega_q^2 = \frac{A}{M} + \frac{F(0) - F(q)}{M} \quad \text{и} \quad F(q) = \sum_1 F(1) e^{-i1q}$$

При исследовании динамики решетки, вообще говоря, необходимо учитывать электрон-фононное взаимодействие, которое иногда может приводить к структурной неустойчивости. Однако, как показывают численные расчеты [13,14], наличие мягких оптических фононных мод в ВТСП  $\text{La}_{2-x}(\text{Ba,Sr})_x\text{CuO}_4$  обусловлено не взаимодействием ионов с электронами проводимости, а неустойчивостью самой ионной решетки.

Поэтому в интересующем нас случае можно пренебрегать влиянием электронов на динамику решетки, т.е. учитывать только /7/.

Для вычисления запаздывающей функции Грина [12]:

$$\langle\langle Q_{-q}(t), Q_q \rangle\rangle = -i\theta(t) \langle [Q_{-q}(t), Q_q] \rangle,$$

необходимо воспользоваться уравнениями Гейзенберга с гамильтонианом /7/ и использовать приближение

$$/8/ \quad \langle\langle \frac{1}{N} \left( \sum_q Q_q, Q_{-q} \right) Q_{-q} | Q_q \rangle\rangle \omega \approx \frac{1}{N} \sum_q \langle Q_q, Q_{-q} \rangle \langle\langle Q_{-q} | Q_q \rangle\rangle \omega.$$

Это приближение дает асимптотически точное решение для гамильтониана /6/, поскольку остальные члены в правой части /7/ пропорциональны  $\frac{1}{N}$ . В результате получаем

$$\langle\langle Q_q | Q_{-q} \rangle\rangle_\omega = \frac{1}{\omega^2 - \Omega_q^2},$$

где частота мягкой моды равна

$$\Omega_q^2 = \Omega_0^2 + \frac{F(0) - F(q)}{M} \approx \Omega_0^2 + c^2 q^2.$$

При этом

$$\Omega_0^2 = -\frac{A}{M} + \frac{B}{M^2} \langle Q^2 \rangle$$

-щель в фононном спектре,  $\langle Q^2 \rangle = \sum_q \langle Q_{-q} Q_q \rangle$  -средний квадрат смещения ионов.

Воспользовавшись соотношением между функцией Грина и корреляционной функцией [12], получаем уравнение для  $\Omega_0$ :

$$\Omega_0^2 + \frac{A}{M} = \frac{B}{M^2} \frac{1}{N} \sum_q \frac{1}{2\Omega_q} \operatorname{cth} \frac{\Omega_q}{2T}.$$

Энергетическая щель  $\Omega_0$  обращается в 0 при некоторой температуре  $T_d$  и при всех  $T < T_d$  остается равной 0 за счет отличного от нуля среднего значения смещения ионов  $\langle Q \rangle$  (см. [16]).

Рассмотрим теперь уравнение /9/ в высокотемпературном и низкотемпературном пределах.

В первом случае  $\frac{\omega_0}{T} \ll 1$  (здесь  $\omega_0 = cq_d$  - частота Дебая,  $q_d$  - дебаевский импульс) уравнение /9/ записывается в следующем виде:

$$M\Omega_0^2 + A = B \frac{T}{N} \sum_q \frac{1}{M\Omega_0^2 + F(0) - F(q)}.$$

Из /10/ получаем значение критической температуры СФП:

$$T_d = \frac{A\omega_0^2 M}{3B}.$$

Из экспериментов [5,6] известно, что  $T_d \approx 530$  К для чистого  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  и линейно уменьшается с увеличением концентрации примеси Ва или Sr

х. Учитывая линейную зависимость  $T_d$  от А в /11/, естественно предположить, что введение примеси Sr или Ва непосредственно влияет на частоту неустойчивой в гармоническом приближении моды колебаний  $\nu_0^2 = -\frac{A}{M}$  и что связь между А и х также линейна:

$$A(x) = A_0(1 - \beta x).$$

Поскольку  $T_d$  обращается в 0 при  $x \approx 0.2$ , в этой области концентраций необходимо рассматривать квантовый предел в уравнении

/9/  $\frac{\omega_0}{T} e^{-\frac{\omega_0}{T}} \ll 1$ . В дебаевском приближении при учете членов порядка не выше  $\Omega_0^2$  получаем

$$\Omega_0^2 \left( g + \frac{1}{2} \ln \frac{\omega_0}{T} \right) + \pi T \Omega_0 - \frac{\pi^2}{3} (T^2 - T_d^2) = 0,$$

где  $g = \frac{2M^2}{3B} \omega_0^2$  и температура СФП

$$T_d = \frac{\omega_0}{\pi} \left( \frac{2AM}{B} \omega_0 - \frac{3}{2} \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Значение  $A_0 = A(0)$  определяется из уравнения /11/:  $T_d(A_0) = 530$  К. Множитель  $\beta$  находим из /13/, учитывая, что при  $x=0.2$  температура структурного перехода обращается в 0 [6]. Из /12/ получаем

$$\Omega_0 = \frac{\pi T}{2P} \left( \sqrt{1 + \frac{4}{3} \left(1 - \frac{T_d^2}{T^2}\right) P} - 1 \right),$$

где  $P = g + \frac{1}{2} \ln \frac{\omega_0}{T}$ .

В окрестности  $T_d$  для статической восприимчивости решетки имеем

$$\chi^{-1}(q=0, \omega=0) = \Omega_0^2 \sim \tau^\gamma.$$

Здесь введена "безразмерная" температура  $\tau = \frac{T - T_d}{T_d}$  и критический индекс  $\gamma$ .

Вне критической области  $\gamma=1$ , когда

$$\frac{3}{4} \left( g + \frac{1}{2} \ln \frac{\omega_0}{T} \right) < \frac{T^2 - T_d^2}{T^2},$$

и в области критических флуктуаций  $\gamma=2$ , когда выполняется противоположное неравенство.

#### 4. Изотопический эффект. Некоторые оценки для $\text{La}_{2-x}(\text{Ba}, \text{Sr})_x\text{CuO}_4$

Обратимся к вычислению температуры сверхпроводящего перехода, воспользовавшись при этом /3/ и /5/. Для  $\lambda$  в дебаевском приближении получаем

$$/14/ \quad \lambda = \lambda_0 \left( 1 - \frac{\pi}{2} \frac{\Omega_0}{\omega_0} \right),$$

где  $\lambda_0 = 3 \frac{N(0)J^2}{M\omega_0^2}$  - значение постоянной электрон-фононной связи при  $\Omega_0=0$ . Согласно /14/ наличие структурного перехода приводит к зависимости  $\lambda$  от температуры:  $\lambda = \lambda(\Omega_0(T))$ , и поэтому выражение /4/ для температуры сверхпроводящего перехода теперь будет уравнением для определения  $T_c$ :

$$/15/ \quad T_c = \omega_0 f(\lambda(T_c)).$$

Это уравнение позволяет определять  $T_c$ , зависящую от концентрации примесных атомов  $x$ . При некотором значении  $x$  температуры сверхпроводящего и структурного переходов совпадают.

Рассмотрим изотопический эффект. Из /15/ получаем уравнение для  $\alpha$ :

$$/16/ \quad \alpha = \frac{1}{2} + \frac{d \ln f(\lambda)}{d\lambda} \frac{\partial \lambda(T_c)}{\partial \ln M}.$$

Для реальных систем реализуется случай низких температур  $\frac{\omega_0}{T} e^{\frac{\omega_0}{T}} \ll 1$ . Таким образом, подставляя /5/ и /14/ в /16/, получаем

$$/17/ \quad \alpha = \frac{1}{2} + \frac{d \ln f(\lambda)}{d\lambda} \frac{\lambda_0}{\omega_0} \frac{\pi}{2} \left( \frac{\lambda}{2} g(\tau) \tau^{\frac{\gamma}{2}-1} \frac{\partial \tau}{\partial \ln M} + \frac{1}{2} \Omega_0 \right),$$

где  $g(\tau) \rightarrow 0$  при  $\tau \rightarrow 0$ .

Выражение /17/ представляет собой уравнение для  $\alpha$ , поскольку  $\alpha$  содержится как в левой, так и в правой частях равенства. Для  $\gamma > 2$  при  $\tau \rightarrow 0$  множитель  $\tau^{\frac{\gamma}{2}-1} \rightarrow 0$  и  $\alpha \rightarrow \frac{1}{2}$ , а для  $\gamma < 2$  вклад этого множителя аномально возрастает. Для рассматриваемой модели  $\gamma=2$  и  $\tau^{\frac{\gamma}{2}-1}=1$ , и при  $\tau \rightarrow 0$  вклад в правой части определяется функцией  $g(\tau)$ . Приведем решение уравнения /17/ для  $\alpha$  в случае  $T_d = T_c$ :

$$\alpha = \frac{1}{2} \frac{1 + \frac{\pi^2}{120} \lambda_0 \left( 1 - \frac{3}{2\pi^2} \frac{1}{f^2(\lambda_0)} \right)}{1 + \frac{\pi^2}{60} \lambda_0}.$$

Для численных оценок примем следующие значения параметров модели, которые можно сопоставить с экспериментальными данными для купрата лантана [17]:

$$\omega_0 = 120 \text{ К}, E_0 = \frac{A^2}{4B} = 0.1 \text{ эВ}, x_0 = \sqrt{\frac{A}{B}} = 0.2 \text{ \AA}, M = 16 \text{ а.е.м.}, N(0)J^2 = 1 \frac{\text{эВ}}{\text{А}}.$$

Графики зависимости  $T_c(x)$ ,  $T_d(x)$ ,  $\alpha(x)$  приведены на рис. 1, 2 и качественно согласуются с экспериментом. Видно, что  $T_c$  достигает максимального своего значения, когда  $T_c = T_d$ , а  $\alpha$  при этом, наоборот, минимально в этой точке.

Обсудим полученные результаты. Наиболее интересным является зависимость параметра  $\alpha$  от концентрации примесей  $x$ , что связано с изменением температуры СФП и влиянием критических флуктуаций на зависимость  $\lambda$  от  $M$  в квантовом случае:  $T_d \sim T_c \ll \omega_0$ . В рамках данной модели СФП критический индекс  $\gamma=2$  и влияние критических флуктуаций не столь существенно, как в случае моделей, где  $\gamma < 2$ . Поэтому можно ожидать, что для более реалистических моделей СФП с  $\gamma \neq 2$  влияние близости  $T_c$  и  $T_d$  на параметр  $\alpha$  будет более существенным. В связи с этим представляло бы интерес провести экспериментальную проверку зависимости  $\alpha$  от концентрации примеси Sr или Ba в  $\text{La}_{2-x}(\text{Ba}, \text{Sr})_x\text{CuO}_4$ .

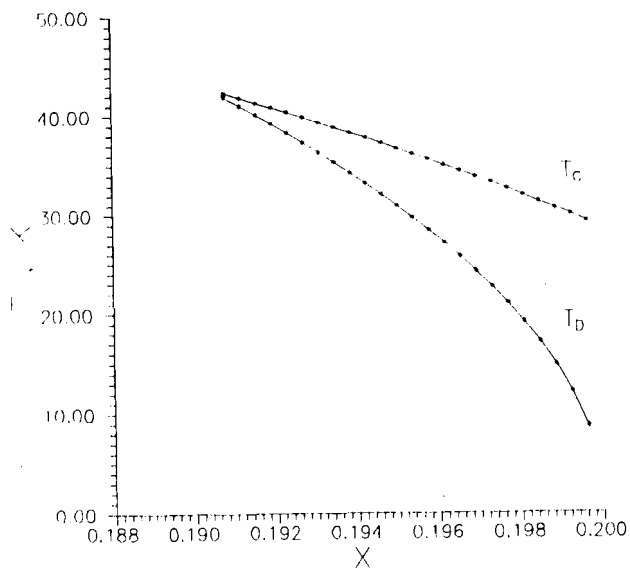


Рис. 1

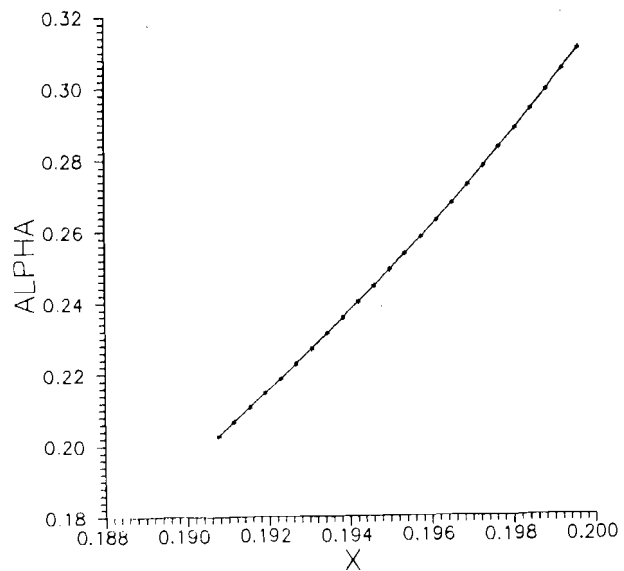


Рис. 2

#### Литература

- [1] Allen P.B. - Nature.1988.V.335.P.396-397
- [2] Hinks D.G. et al.- Nature.1988.V.335.p.419-421
- [3] Zur Loye Y.C. et al.- Science.1988.V.238. P.1558-1560
- [4] Batlogg B. et al.- Phys.Rev.Lett.1987.V.58. 22.P.2333-2336
- [5] Jorgensen J.d. et al.- Phys.Rev.Lett.1987.V.58. 10.P.1024-1027
- [6] Fleming R.M. et al.-Phys. Rev.B.1987.V.35. 13.P.7191-7194
- [7] Vujičić G.M., Aksenov V.L., Plakida N.M., Stamenković S.- Phys.Lett.A.1979.V.73. 5,6.P.439-441
- [8] Plakida N.M., Drechsler S.L. - Europhys.Lett.1987.V.4.P.1309-1311
- [9] Боголюбов Н.Н., Толмачев В.В., Ширков Д.В. Новый метод в теории сверхпроводимости. М.:Наука, 1977
- [10] Вуйчич Г.М., Петру З.К., Плакида Н.М. - ТМФ.1981.Т.46. 1.С.91-97
- [11] Вонсовский С.В. и др. Сверхпроводимость переходных металлов, их сплавов и соединений.М.:Наука, 1977
- [12] Зубарев Д.Н.Неравновесная статистическая термодинамика.М.:Наука, 1971
- [13] Barišić S.et al.-Int.J.Mod.Phys.B.1988.V.2.P.827-831
- [14] Cohen R.E.et al.-Phys.Rev.Lett.1988. V.62.P.831-834.
- [15] Rovel J.M. - Solid.St.Comm.1976.V.19.P.1131-1132
- [16] Плакида Н.М., Тончев Н.С. - ТМФ.1985.Т.63.С.270-279
- [17] Aksenov V.L., Flach S., Plakida N.M.- Phis.Stat.Sol.(b).1988.V.149.K7
- [18] Жернов А.П., Тренин А.Е. - ФТТ.1988.Т.30. 5.С.1353-1358
- [19] McMillan W.L. - Phys.Rev.1968.V.167.P.331-339

Рукопись поступила в издательский отдел  
21 сентября 1989 года.